



TITLE:

# 摂動法による三次元Diatomic Latticeの分散関係及びFree Energy (Lattice Green's Function)

AUTHOR(S):

和田, 宏

---

CITATION:

和田, 宏. 摂動法による三次元Diatomic Latticeの分散関係及びFree Energy (Lattice Green's Function). 数理解析研究所講究録 1971, 130: 200-210

ISSUE DATE:

1971-11

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/106569>

RIGHT:

## 摂動法による三次元 Diatomic Lattice の 分散関係及び Free Energy

北大 理 和田 宏

### § 1. 序

Mattuck は  $T=0^{\circ}\text{K}$  で Einstein phonon から出発し、Green 関数の摂動展開を行い、diagram を全部集めることによって、単原子鎖の分散関係と零点振動のエネルギーを正確に求めている。彼の計算において、相互作用の項自体はかならずしも小さくなく、摂動展開及びその収束性はしたがって数学的には怪しいが、正しい結果が得られるという意味で、exact に解ける多体問題の一つの簡単な sample を与えている。

吾々は同じ精神に基づいて、 $T \neq 0^{\circ}\text{K}$  の場合に対して、温度 Green 関数を使って、適当な virtual monatomic lattice を無摂動 Hamiltonian に送ぶことによって、diatomic lattice の分散関係とその Free energy を三次元の場合に求めてみた。自由エネルギーの計算は Mattuck の基底エネルギーの計算に比べて、多少簡単になっていると思われる。

§ 2. model Hamiltonian と  $k$  表示による第二量子化  
無擾動 Hamiltonian として nearest neighbour interaction  
を持つ次の Hamiltonian を選ぶ。

$$(1) \quad H_0 = \sum_{l,m,n} \frac{P(l,m,n)^2}{2m_0} + \sum_{l,m,n} \left[ \frac{\gamma_1}{2} (u(l+1,m,n) - u(l,m,n))^2 \right. \\ \left. + \frac{\gamma_2}{2} (u(l,m+1,n) - u(l,m,n))^2 + \frac{\gamma_3}{2} (u(l,m,n+1) - u(l,m,n))^2 \right]$$

吾々は  $(2N)^3$  個の原子を考え、 $x, y, z$  方向で各々  $2N$  個ご  
とに周期境界条件を満足している Simple Cubic lattice を仮  
定している。また virtual mass  $m_0$  は

$$(2) \quad \frac{2}{m_0} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m}$$

で定義される。

もし、NaCl 型の結晶を考え質量  $M$  と  $m$  が交互に配列されて  
いるとするならば、(2) 式によって定義される質量  $m_0$  を host  
と考えたときの全系の Hamiltonian  $H$  と  $H_0$  の差は

$$(3) \quad H_1 = \sum_{l_1+l_2+l_3=\text{even}} \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{m_0} \right) P^2(l_1, l_2, l_3) + \sum_{l_1+l_2+l_3=\text{odd}} \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m} - \frac{1}{m_0} \right) P^2(l_1, l_2, l_3)$$

吾々は (1) 式を無擾動 Hamiltonian と考え (3) 式を擾動項とみ  
なし、温度 Green 関数法によって Hamiltonian  $H$  の基準振  
動数と Free energy を求める。

今、変位  $u(\vec{l})$ , ( $\vec{l} \equiv (l_1, l_2, l_3)$ ) 及び運動量  $p(\vec{l})$  をフ  
リエ展開すると、

$$(4) \quad u(\vec{l}) = \frac{1}{\sqrt{2N^3}} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{l}}$$

$$P(\vec{l}) = \frac{1}{\sqrt{2N^3}} \sum_{\vec{k}} P(\vec{k}) e^{+i\vec{k} \cdot \vec{l}}$$

$$(5) \quad \text{ここで} \quad \Phi(\vec{k}) = -i \left( \frac{1}{2m_0 \omega_0(\vec{k})} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\vec{k}}^+ - a_{-\vec{k}})$$

$$P(\vec{k}) = \left( \frac{m_0 \omega_0(\vec{k})}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^+)$$

かつ、 $\omega_0^2(\vec{k})$  は無摂動系の固有振動数で

$$(6) \quad \omega_0^2(\vec{k}) = \frac{2\gamma_1(1-\cos k_1) + 2\gamma_2(1-\cos k_2) + 2\gamma_3(1-\cos k_3)}{m_0}$$

で定義される。また、 $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^+] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$ ,  $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}] = [a_{\vec{k}}^+, a_{\vec{k}'}^+] = 0$ 。

(4), (5), (6) 式を (1) 式に代入すると

$$(7) \quad H_0 = \sum_{\vec{k}} \omega_0(\vec{k}) \left( a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right)$$

を得る。簡単のため常に  $\hbar = 1$  に取られている。

一方、摂動項は、(4) 式を代入すると、

$$(8) \quad H' = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{1}{(2N)^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} P(\vec{k}_1) P(\vec{k}_2)^* \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}} \\ + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m} - \frac{1}{m_0} \right) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} P(\vec{k}_1) P(\vec{k}_2)^* \frac{1}{(2N)^3} \sum_{\substack{\vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 = \text{even} \\ \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 = \text{odd}}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}}$$

ここで wave vector  $\vec{k} = (k^1, k^2, k^3)$  は  $H_0$  の unit cell  $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$

の逆格子空間の First Brillouin zone 内のベクトルである。す

なわち、 $s_1, s_2, s_3$  を整数として

$$(9) \quad -\pi \leq k^1 = \frac{2\pi s_1}{2N} < \pi, \quad -\pi \leq k^2 = \frac{2\pi s_2}{2N} < \pi, \quad -\pi \leq k^3 = \frac{2\pi s_3}{2N} < \pi.$$

次に

$$(10) \quad \sum_{\substack{\vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 = \text{even}}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}}$$

なる和を考える。

$l_1 + l_2 + l_3 = \text{even}$  の条件での和は

$$(11) \quad \begin{aligned} \vec{a}_1 &= (0, 1, 1) = \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \\ \vec{a}_2 &= (1, 0, 1) = \vec{e}_1 + \vec{e}_3 \\ \vec{a}_3 &= (1, 1, 0) = \vec{e}_1 + \vec{e}_2 \end{aligned}$$

を primitive vector とする面心立方格子 (F.C.C.) を考えていることになる。(但し, cell の数は  $N^3$  個)

(10) 式を F.C.C. 格子の格子点に関する和と読みかえると (10) 式は

$$(12) \quad \sum_{\vec{l} \in \text{F.C.C.}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}} = \frac{1}{2} (2N)^3 \sum_n \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{g}_n}$$

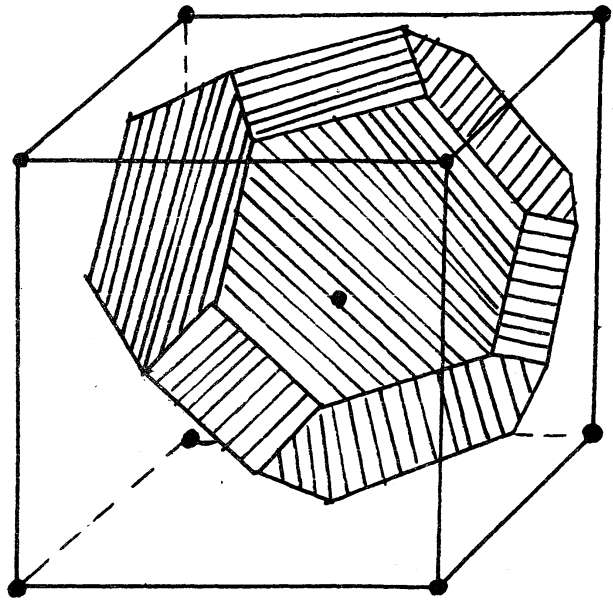
ここで,  $\vec{g}_n$  は (11) 式で定義される F.C.C. 格子の逆格子ベクトルであり, primitive vector は

$$(13) \quad \begin{aligned} \vec{g}_1 &= \pi (-1, 1, 1) \\ \vec{g}_2 &= \pi (1, -1, 1) \\ \vec{g}_3 &= \pi (1, 1, -1) . \end{aligned}$$

$$(14) \quad \begin{aligned} \text{また, } \sum_{l_1+l_2+l_3=\text{odd}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}} &= e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{e}_1} \sum e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{l}} \\ &= e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{e}_1} \frac{(2N)^3}{2} \sum_n \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{g}_n} \end{aligned}$$

そこで (8) 式の  $\vec{l}=1$  に関する和を考えると,  $|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$  に対しては (2) 式の関係により零となる。一方  $|\vec{k}_1, \vec{k}_2|$  が (9) 式を満足しなければならぬために,  $|\vec{k}_2|$  を例へば固定すると唯一つの  $\vec{g}_n$  のみが許されることになる。言い変えると図のような B.C.C. の第一、第二 Brillouin zone (以下 1 B.Z., 2 B.Z. と略記する。) を考えたとき, 2 B.Z. を 1 B.Z. に reduce すると互いに重なり合うような点  $|\vec{k}_1, \vec{k}_2$  の pair のみが (8) 式に寄与する。以下, そのよ

うな pair を  $(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{g})$ ,  $(\mathbf{k}-\mathbf{g}, \mathbf{k})$  のように書く。前者は  $\mathbf{k}$  を 1 B.Z. に属するとしたときで、後者は  $\mathbf{k}$  が 2 B.Z. に属すると思ったとき、記号とする。



F.C.C. 格子の逆格子 (B.C.C.) の第一第 = Brillouin Zone

このような  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  に対しては常に  $e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \vec{e}_1} = -1$  である事に注意すると、(8) 式の  $H'$  は次のように表現される。

$$\begin{aligned}
 (15) \quad H' &= \frac{1}{2} Q \sum_{\mathbf{k}}^{(1. \text{B.Z.})} \sqrt{\omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}) \omega_0(\mathbf{k})} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} + a_{-\mathbf{k}+\mathbf{g}}^+) (a_{\mathbf{k}}^+ + a_{-\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{1}{2} Q \sum_{\mathbf{k}}^{(2. \text{B.Z.})} \sqrt{\omega_0(\mathbf{k}) \omega_0(\mathbf{k}-\mathbf{g})} (a_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + a_{-\mathbf{k}-\mathbf{g}}^+) (a_{\mathbf{k}}^+ + a_{-\mathbf{k}}),
 \end{aligned}$$

そこで、 $Q \equiv \frac{m-M}{m+M}$  及び簡単のために

$$(16) \quad I(\mathbf{k}+\mathbf{g}, \mathbf{k}) \equiv \frac{1}{2} Q \sqrt{\omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}) \omega_0(\mathbf{k})} = \frac{1}{2} Q \sqrt{\omega_0(\mathbf{k}) \omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})}$$

を導入する。  $\equiv I(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{g})$

## §. 3. phonon Green関数と分散関係

phonon displacement operator  $\phi_{1k}(u)$ 

$$(17) \quad \phi_{1k}(u) = a_{1k}(u) + a_{-1k}(u)^+ \\ \phi_{-1k}(u) = a_{1k}^+(u) + a_{-1k}(u) = \phi_{1k}^+(u)$$

を導入する。  $a_{1k}(u)$ ,  $a_{1k}^+(u)$  は

$$(18) \quad a_{1k}(u) = e^{uH} a_{1k} e^{-uH}, \quad a_{1k}^+(u) = e^{uH} a_{1k}^+ e^{-uH}$$

で定義される。 Heisenberg 表示の創生, 消滅演算子である。

(17) の演算子を使うと, phonon Green関数は

$$(19) \quad D(1k, u) = \langle T(\phi_{1k}(u) \phi_{-1k}(0)) \rangle$$

で定義される。  $T$  は  $u$  をならべる time ordering operator で、かつ  $\langle A(u) \rangle \equiv \text{Tr}(e^{-\beta H} A(u)) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$  のような全系に関する温度平均である。 ( $\beta = \frac{1}{kT}$ ) $\beta$  の周期性と Boson の性質を使うと Fourier 展開が可能である。

$$(20) \quad D(1k, u) = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_l} D(1k, i\nu_l) e^{-i\nu_l u} \\ \nu_l = \frac{2\pi l}{\beta} \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

free propagator に対しては

$$(21) \quad D_0(1k, u) = \langle T(\phi_{1k}(u) \phi_{-1k}(0)) \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_l} D_0(1k, i\nu_l) e^{-i\nu_l u}$$

容易に定義から次式を得る。

$$(22) \quad D_0(1k, i\nu_l) = \frac{1}{i\nu_l + \omega_0(1k)} - \frac{1}{i\nu_l - \omega_0(1k)} = \frac{-2\omega_0(1k)}{(i\nu_l)^2 - \omega_0(1k)^2}$$

一方, exact Green関数  $D(1k, i\nu_l)$  は Linked cluster theorem を使うと、

(23)  $D(k, i\nu_e) = \int_0^\beta du \langle T(\mathcal{U}(\beta) \phi_k(u) \phi_k(0)) \rangle_{0L} e^{i\nu_e u}$   
 と変形される。 $\langle \dots \rangle_{0L}$  は  $e^{-\beta H_0}$  で温度平均をとり、かつ  
 linked した diagram のみを集めることを意味する。また

$$(24) \quad \mathcal{U}(\beta) = T \exp\left(-\int_0^\beta H_1(u) du\right).$$

(23) 式の 0 次は

$$D_0(k, i\nu_e) = \int_0^\beta du \langle \phi_k(u) \phi_k^\dagger(0) \rangle_0 e^{i\nu_e u} = \frac{-2\omega_0(k)}{(i\nu_e)^2 - \omega_0(k)^2}$$

で free propagator を得る。1 次は

$$D_1(k, i\nu_e) = \int_0^\beta du e^{i\nu_e u} \langle T(-1) \int_0^\beta du' \sum_{k'}^{1.B.2} I(k+g, k') \phi_{k+g}(u) \phi_{k'}^\dagger(u') \times \phi_k(u) \phi_k^\dagger(0) \rangle_0 = 0$$

$g=0$  以外には取り得ないので寄与は零。同様に奇数次からの寄与はない。2 次は

$$D_2(k, i\nu_e) = D_0(k, i\nu_e) (-I(k, k+g)) D_0(k+g, i\nu_e) (-I(k+g, k)) \times D_0(k, i\nu_e)$$

$$\vdots$$

ここで次のように diagram を定義する

$$(25) \quad D(k, i\nu_e) \equiv \text{---} k, i\nu_e \text{---}, \quad D_0(k, i\nu_e) \equiv \text{---} k, i\nu_e \text{---}$$

$$-I(k+g, k) \equiv \text{---} g \text{---}$$

ならば次のような diagram eq. が得られる。

$$(26) \quad \text{---} k, i\nu_e \text{---} = \text{---} k, i\nu_e \text{---} + \text{---} k, i\nu_e \text{---} \text{---} g \text{---} \text{---} k+g, i\nu_e \text{---} + \text{---} k, i\nu_e \text{---} \text{---} g \text{---} \text{---} k+g, i\nu_e \text{---} + \dots$$

proper self energy  $\Sigma(k, i\nu_e)$  かつ

$$(27) \quad \Sigma(k, i\nu_e) = \text{---} g \text{---} \text{---} k+g, i\nu_e \text{---} = I(k+g, k) D_0(k+g, i\nu_e) I(k, k+g)$$



で与えられることに注意すると Dyson eq. を得る。

$$(28) \quad D(k, i\nu_L) = D_0(k, i\nu_L) + D_0(k, i\nu_L) \sum (k, i\nu_L) D(k, i\nu_L).$$

故に (6), (22) 式を使うと。

$$(29) \quad D(k, i\nu_L) = \frac{1}{D_0(k, i\nu_L)^{-1} - I(k+g, k)^2 D_0(k+g, i\nu_L)}$$

$$= \frac{-2\omega_0(k) [(i\nu_L)^2 - \omega_0(k+g)^2]}{((i\nu_L)^2 - \omega_0^2(k))((i\nu_L)^2 - \omega_0^2(k+g)) - Q^2(\omega(k+g)\omega(k))^2}.$$

$$(30) \quad \omega_0^2(k) = \frac{m+M}{mM} [\gamma_1(1-\cos k_1) + \gamma_2(1-\cos k_2) + \gamma_3(1-\cos k_3)]$$

$$\omega_0^2(k+g) = \frac{m+M}{mM} [\gamma_1(1+\cos k_1) + \gamma_2(1+\cos k_2) + \gamma_3(1+\cos k_3)]$$

に注意すると (29) 式の pole は

$$(31) \quad [(i\nu_L)^2]^2 - \frac{2(m+M)}{mM} (\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3) (i\nu_L)^2$$

$$+ \frac{4}{mM} [(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3)^2 - (\sum_{i=1}^3 \gamma_i \cos k_i)^2] = 0$$

で与えられる。したがって

$$(32) \quad (i\nu_L)^2 = \omega^2 = \frac{1}{mM} [(m+M)(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3) \pm \sqrt{(m-M)^2(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3)^2 + 4mM(\sum_{i=1}^3 \gamma_i \cos k_i)^2}]$$

$k = (k_1, k_2, k_3)$  に対応する acoustical band (-sign) と optical band (+sign) の振動数を各々  $\omega^-(k)$ ,  $\omega^+(k)$  と表わすと, (29) 式は

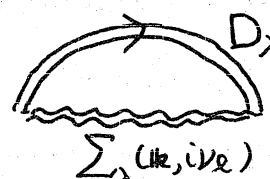
$$(33) \quad D(k, i\nu_L) = \frac{-2\omega_0(k) [(i\nu_L)^2 - \omega_0(k+g)^2]}{[(i\nu_L)^2 - \omega^-(k)^2][ (i\nu_L)^2 - \omega^+(k)^2]}.$$

#### §. 4. 自由エネルギー -

Free energy  $F$  を求めるには, unperturbed Free energy  $F_0$  からの増分  $\Delta F$  を求めればよいから, Feynmann の定理から

$$(34) \quad \Delta F = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle H'(\lambda) \rangle_\lambda$$

で与えられる。ここに  $H(\lambda) = \lambda H'$ ,  $H(\lambda) = H_0 + \lambda H'$  なる linear parameter  $\lambda$  を含んでゐる。また  $\langle H_1(\lambda) \rangle_\lambda$  は

$$(35) \quad \langle H_1(\lambda) \rangle_\lambda = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell}^{\text{B.Z.}} \frac{D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}{\sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}$$


で与えられる。また

$$(36) \quad D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell) = \frac{D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}{1 - \sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell) D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}$$

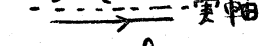
proper self-energy  $\sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell)$  は今の場合

$$(37) \quad \sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell) \equiv \begin{array}{c} \text{---} \lambda I(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{g}) \text{---} \\ \uparrow \\ \text{---} \lambda I(\mathbf{k}+\mathbf{g}, \mathbf{k}) \text{---} \end{array} = (\lambda I(\mathbf{k}+\mathbf{g}, \mathbf{k}))^2 D_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}, i\nu_\ell)$$

したがって (34) 式は

$$(38) \quad \begin{aligned} \Delta F &= -\frac{1}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell}^{\text{B.Z.}} \frac{D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell) \sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}{1 - \sum_{\lambda} D_\lambda(\mathbf{k}, i\nu_\ell) D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell)} \\ &= -\frac{1}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell}^{\text{B.Z.}} \frac{(\lambda I(\mathbf{k}+\mathbf{g}, \mathbf{k}))^2 D_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}, i\nu_\ell) D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}{1 - (\lambda I(\mathbf{k}+\mathbf{g}, \mathbf{k}))^2 D_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}, i\nu_\ell) D_0(\mathbf{k}, i\nu_\ell)} \\ &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell}^{\text{B.Z.}} \ln \left| \frac{D^{-1}(\mathbf{k}, i\nu_\ell)}{D_0^{-1}(\mathbf{k}, i\nu_\ell)} \right| \\ &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell}^{\text{B.Z.}} \ln \left| \frac{((i\nu_\ell)^2 - \omega^+(\mathbf{k})^2)((i\nu_\ell)^2 - \omega^-(\mathbf{k})^2)}{((i\nu_\ell)^2 - \omega_0(\mathbf{k})^2)((i\nu_\ell)^2 - \omega_0(\mathbf{k})^2)} \right| \end{aligned}$$

ここで良く知られた公式

$$(39) \quad \frac{1}{\beta} \sum_{\ell} f(i\nu_\ell) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty - i0}^{\infty - i0} f(z) \frac{dz}{e^{\beta z} - 1}$$


を使うと  $\Delta F$  は

$$\nu_\ell = \frac{2\pi\ell}{\beta} \quad \ell = 0, \pm 1, \dots$$

$$(40) \quad \Delta F = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{dz}{e^{\beta z} - 1} \ln \left| \frac{(z^2 - \omega^+(\mathbf{k})^2)(z^2 - \omega^-(\mathbf{k})^2)}{(z^2 - \omega_0(\mathbf{k})^2)(z^2 - \omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})^2)} \right|,$$

一度部分積分をしてあげて、実軸上のpole計算を行うと

$$\begin{aligned} (41) \quad \Delta F &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln |(1 - e^{-\beta \omega^+(\mathbf{k})})(1 - e^{+\beta \omega^+(\mathbf{k})})(1 - e^{-\beta \omega^-(\mathbf{k})}) \\ &\quad \times (1 - e^{+\beta \omega^-(\mathbf{k})})| \\ &\quad - \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln |(1 - e^{-\beta \omega_0(\mathbf{k})})(1 - e^{+\beta \omega_0(\mathbf{k})})(1 - e^{-\beta \omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})}) \\ &\quad \times (1 - e^{+\beta \omega_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})})| \\ &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} (\beta \omega^+(\mathbf{k}) + 2 \ln |1 - e^{-\beta \omega^+(\mathbf{k})}|) + (\beta \omega^-(\mathbf{k}) + 2 \ln |1 - e^{-\beta \omega^-(\mathbf{k})}|) \\ &\quad - \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} (\beta \omega_0(\mathbf{k}) + 2 \ln |1 - e^{-\beta \omega_0(\mathbf{k})}|), \end{aligned}$$

第二項目は明らかに H<sub>0</sub> system の free energy F<sub>0</sub> である

から全系の Free energy は(41)式の第一項

$$(42) \quad F = kT \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\omega^+(\mathbf{k})}{2kT} + \ln |1 - e^{-\beta \omega^+(\mathbf{k})}| \right) \\ + \left( \frac{\omega^-(\mathbf{k})}{2kT} + \ln |1 - e^{-\beta \omega^-(\mathbf{k})}| \right).$$

また平均エネルギーは

$$(43) \quad \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} (-\beta F) = \sum_{\mathbf{k}} \omega^+(\mathbf{k}) \left[ \frac{1}{e^{\beta \omega^+(\mathbf{k})} - 1} + \frac{1}{2} \right] \\ + \omega^-(\mathbf{k}) \left[ \frac{1}{e^{\beta \omega^-(\mathbf{k})} - 1} + \frac{1}{2} \right]$$

となつて、良(知られた結果を得る。

参考文献

1. R. D. Mattuck, *Ann. Phys.* 27 No 2 (1964)
2. J. M. Luttinger & J. C. Ward, *Phys. Rev.* 118,  
No 5 (1960) p 1418.
3. T. D. Schultz, *Quantum Field Theory and the  
Many-Body Problem*, Gordon and Breach,  
New York (1964) p. 75 ~ 79.
4. A. A. Maradudin, G. H. Weiss, D. W. Jepsen,  
*J. Math. Phys.* 2 No 3 (1961) p 349, Appendix D.